ラテックス系 —— 反強磁性三角格子 —— ガラス転移

筑大物工　　小川 泰　　中島 幸久

§1．はじめに

基底状態の縮重のように、フラストレート系で起る状態や現象の多様性は極めて興味深い。この研究会の懇親会でも話題になったように[1]、大袈裟にいえば、フラストレーションの問題は．生命現象を物理的に理解しようという立場での本質的に重要な問題に密接に関連しているように思われる。スピン・グラスの問題を契機に．フラストレーションという概念が普及して関心を集めていることは，ランダム系の物理学としても新しい段階に入ったとみることができよう。

このような観点から見ると，模型を修正して長距離秩序の発生を容易にしたり，長距離秩序の概念を導入して通常の相転移理論の立場に立つよりも、短距離秩序に基づいて議論をし、必要な新概念を発見してゆこうとする方が，問題に内在する多様性を損うことが少なく．新しい展望が開けることを期待できそうに思われる。ここでは、純粋なフラストレート系として反強磁性三角格子を考え、相互作用は隣接対間にのみ与える。模型としては、①静的なイジング模型、②運動法則を導入した模型、③ハイゼンベルグ模型等を扱うが，特に縮重した基底状態に限定した詳しい考察を行う。

§2．準二次元ラテックス系の迷路紋様

フラストレート系の典型である反強磁性三角格子のイジング模型については．Wannierが基底状態の縮重度を厳密に求めている[2]。しかし，縮重した基底状態の集合の性質については．殆んど調べられていないようである。われわれは、準二次元ラテックス系に生じる迷路紋様の成因を探り、あわせてパターンや紋様の分類・整理の方法を模索することから反強磁性三角格子への興味を深めた。ラテックス系の紋様は、不完全な第三次元方向への僅かな自由度が迷路状の明暗紋様を生じる原因であるが、厚みが有限の準二次元での剛体球充填効率の問題として．静的パターンの特徴を説明できる。このことについては既に詳述したものがある[3]ので、以下ではラテックス系自体にはこだわらずに、反強磁性三角格子イジング模型の基底状態（この格子の最小単位である正三角形状に配置した3点の全てが同一の状態になることが禁じられている）のアンサンブルについての考察を進める。

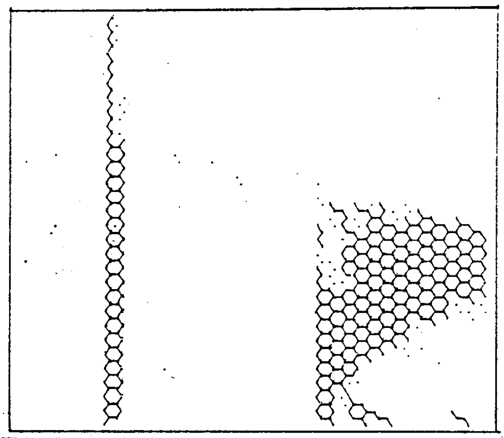
§3．フラストレート系の動的性質

運動法則を導入して．基底状態アンサンブルに属する諸状態の間につながりを与えると．位相空間の構造の特徴が見えて来そうである。これはかなり困難な作業ではあるが、もっと複雑な系では殆んど不可能であり、この系については努力に価する。関心の一つは．格子気体としてみたときに．密度の関数としてのふるまいに・液体状態とアモルファス状態の間の区別に相当するものが現われはしまいかという期待に基づいている。基底状態アン

サンプルに属する二つの配位（全系の配位）を比べたときに、一組の隣接対の状態を交換しただけの違いであるときに、これら二つの配位は直接につながっているとする。いい換えると、基底状態の一つで、一組の隣接対が相互に状態を交換しても相変らず基底状態になっているならば、その状態交換は許されるという運動法則である。

この模型による予備的なモンテカルロシミュレーションによれば、磁化の値約 0.15 付近を境にして動的な性質が変わっているように見受けられる。ここで動的性質というのは、①系全体の動きの頻度。②動きの頻度は各格子点に対して一様であるか、それともむらが大きいかということ。③むらがあるならばその空間的配置の様子にはどんな特徴があるかということ。などである。これらの事柄は当然統計をとる時間尺度に依存しているので絶対的な意味はないと思うが、何らかの事実を認知する契機を与える作業上の意味だけで充分である。問題はそれにより何が判るかである。

動きの頻度がある規準値を越える点だけを磁化 0.32 の場合について図示したのが図1である。動きの局在化は明白であり、その空間配位の様子も意味ありげである。系全体の 88%を占める図示されていない点の動きは、系全体の動きの35%に過ぎない。このことの意味は、§5の議論によって理解できる。



(注)
(図中の孤立点は動きの頻度が規準値に近い点)

図1　動きの頻度（磁化 0.32）

§4．ハイゼンベルグ模型の基底状態

フラストレートしていない系の反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態では、縮重したネール状態はそれ以外の状態を経てつながっており、そのつながりの実効的な barrier が重要である。つまり、ハミルトニアンの z 成分、すなわちイジング模型の基底状態に対して、xy 成分を通じて励起状態がどれ程混るかという問題である。一方、フラストレートしている場合には、xy 成分は基底状態どうしを直接につないでいるので、励起状態の混りは重要ではない。むしろ、縮重除去によってバンドを形成する類の問題であり、いわば、バンドの半巾を推定する問題である。イジング模型の基底状態の全配位を底としてハミルトニアンの xy 成分を表示すれば、前節の議論でのつながりに相当する要素は $J/2$ (70)、それ以外の要素は 0 の対称行列になっている。この行列の奇数乗の跡が 0 であることに気付くならば、対称なバンドに相当することが判る。つまり、この行列に対応する位相空間のつながり具合には奇数員環はなく、バンド形成の問題としてはフラストレーションがないのである。結局、ハイゼンベルグ模型とイジング模型での基底状態エネルギー差 $(E_H - E_I)$ は、この行列の節をもたない固有状態を使って見積れることがわかる。全配位の振幅を一定として見積れば、$E_H - E_I$ の上限を与え、イジング模型の基底状態アンサンブルにおいて、隣

接対が前節の運動法則による可動対である確率に比例することが判る。このアンサンブルを菊池近似で扱うとこの確率は 0.08 と計算される。但し、この確率計算自体は厳密値の過大評価か過小評価かの保証がない。このように求めた基底状態エネルギーは、同じ結合定数の強磁性ハイゼンベルグ模型の場合の 0.83 倍である。

§5. 配位の詳細とその動的性質

丁度最大値1/3の磁化に対応する配位では多数派スピンは蜂の巣格子、少数派スピンは三角格子を形成し、境界条件に合致しさえすれば単結晶的配位になっている。この状況から出発して、磁化を僅かに減少させる際に起る新しい事態の認識を増しながら、磁化のない状態への視点を定めて行こうというのが次の課題である。

単結晶的配位も副格子についての縮重はあるが、§3の運動法則では動けない。反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態の問題としては、通常の Neel 状態から出発する話と本質的に同じことになる。

次に、ただ一つの多数派スピンが少数派に寝返ったとすると、このスピンは多数派の蜂の巣格子上を自由に動き回ることができる。この乱れを、「自由な乱れ」と名付けておこう。（図2）　（図では少数派スピンを○で囲み、多数派スピンを―で結ぶ）

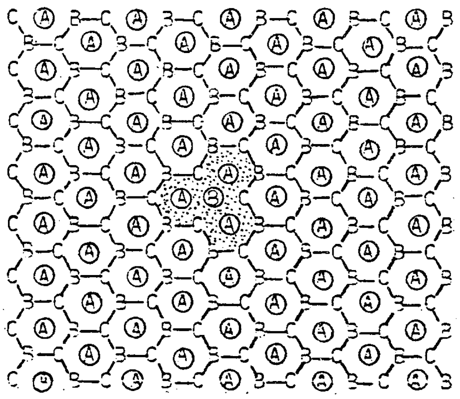


図2　　自由な乱れ

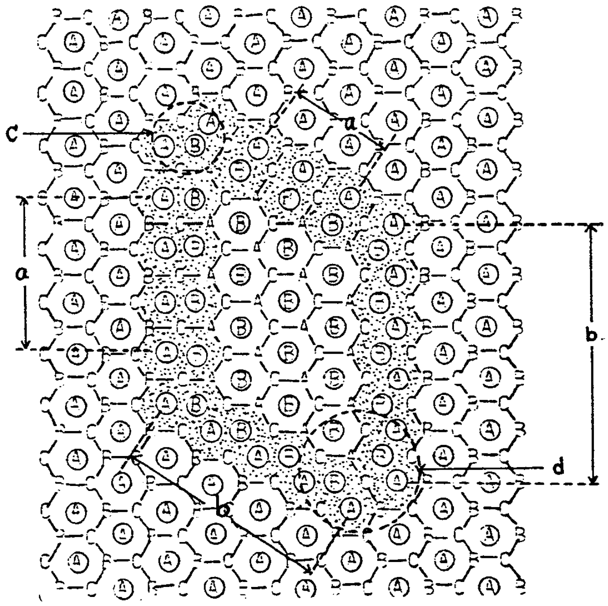
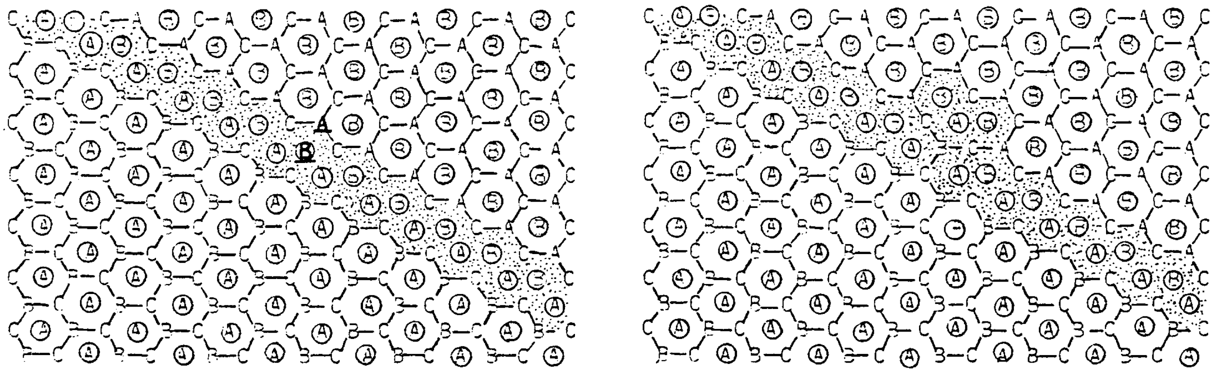


図3　A副格子の三角格子結晶とB副格子の三角格子結晶の境界の例

a：梯子状境界
b：階段状境界
c：梯子状境界の屈折部
d：階段状境界の屈折部

多結晶的配位では、図3のような結晶境界ができる。A副格子の三角格子結晶とB副格子の三角格子結晶の境界では境界A側の縁はA副格子の点、B側の縁はB副格子の点になっていることを注意しておく。図3の境界の a, b, c, d の部分はそれぞれ、「梯子状境界」「階段状境界」「梯子状境界の屈折部」「階段状境界の屈折部」と呼ぶことにする。梯子状境界の屈折部は最も短い階段状境界、階段状境界の屈折部は最も短い梯子状境界と見ることができる。

真直ぐに無限に伸びた梯子状境界は動くことができない。それに対して階段状境界は，図4のように動くことができる。このときの動いた痕跡は梯子状境界の屈折部と見なすことができる。

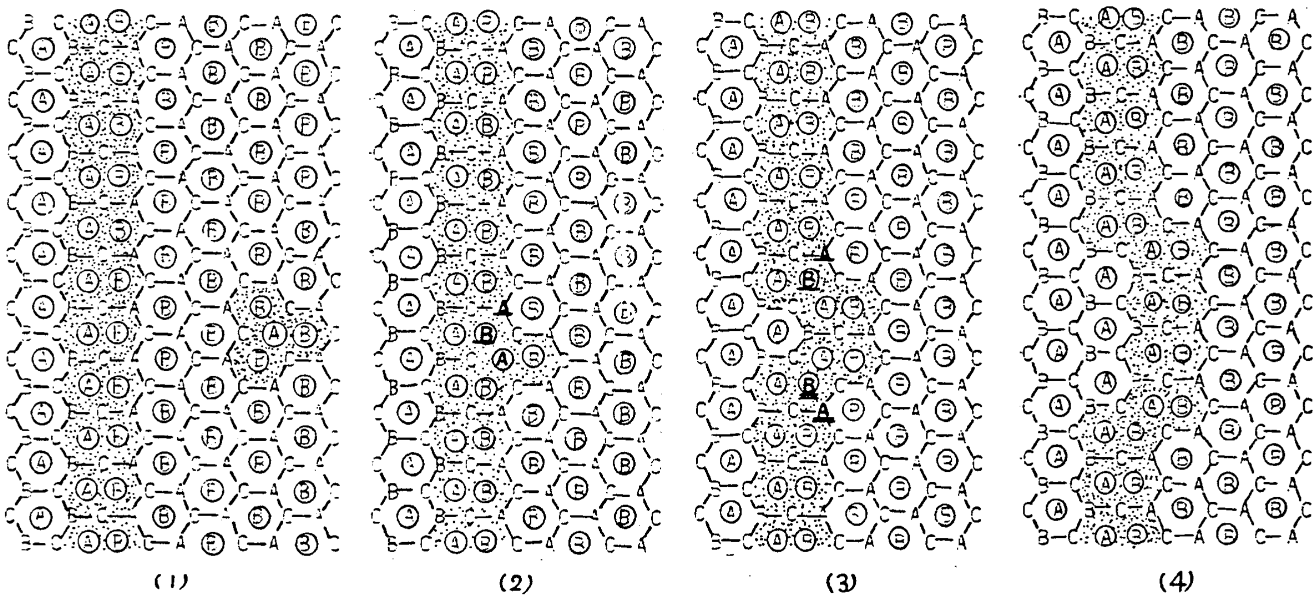


(1)　　(2)

図4　階段状境界の動き

(1)で下線を引いたA Bで状態を交換したものが(2)である.

梯子状境界の片側に自由な乱れが一つ付着すると図5(3)のようになるが，これは階段状境界の屈折部と見なすことができる。これは一種の磁壁ソリトンと磁壁反ソリトンの対のように見ることもでき、それらは互いに離れることができ、梯子状境界を部分的に平行にずらしたような形を作って，梯子状境界に沿う動きを可能にする。しかし、自由な乱れは梯子状境界を越えて反対側に脱出することはできない。ところが、自由な乱れが二個、梯子状境界の同じ側に付着したときには、前記のソリトンと反ソリトンの対消滅によって，一個の自由な乱れが、境界の反対側に脱出することができる。（図6）



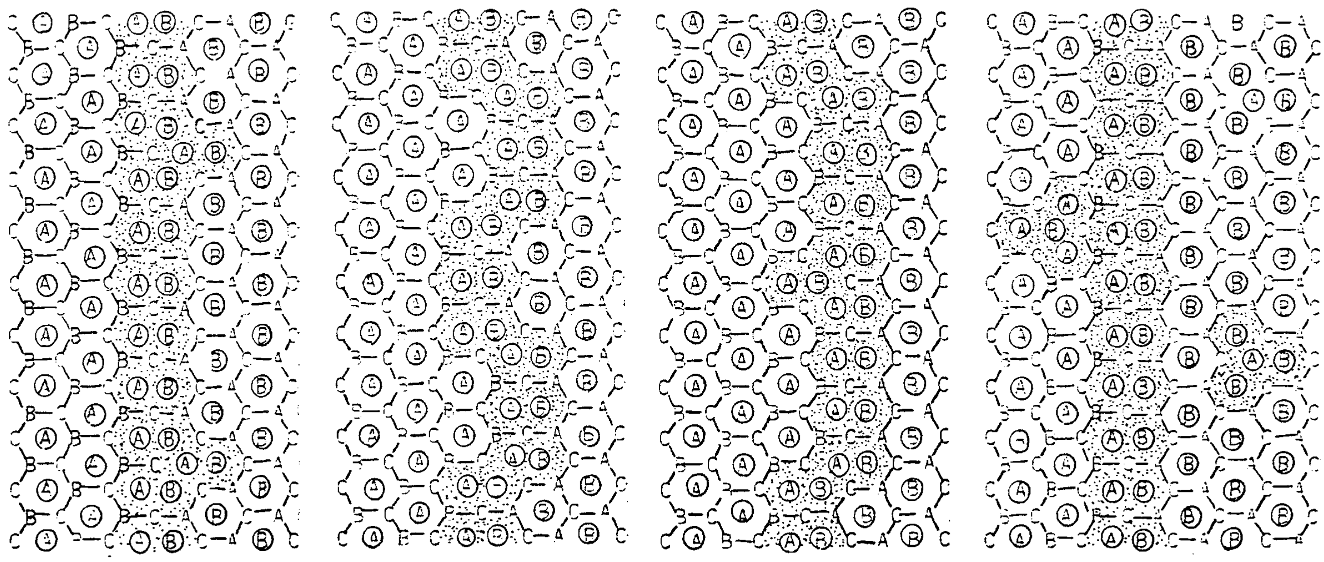
(1)　　(2)　　(3)　　(4)

図5　梯子状境界と一個の自由な乱れの振舞の例

(1)：梯子状境界と一個の自由な乱れがそれぞれ独立に存在する場合

(2)：梯子状境界の片側に一個の自由な乱れが付着

(3)：(2)のA Bを交換　　(4)：(3)のA B，A Bを交換



(1) (2) (3) (4)

図 6 梯子状境界と二個の自由な乱れの振舞の例

(1)：梯子状境界の片側に二個の自由な乱れが付着

(2)：梯子状境界に沿った動き

(3)：一個の自由な乱れが境界の反対側に脱出する直前

(4)：二個の自由な乱れ（境界をはさんでそれぞれ1個）の生成

このように配位を詳細に分析することを試みているが、フラストレート系に起る、非常に興味深い事柄の多様性を思い知らされる。ここで思い起すのは、15年程前に流行したセル・オートマトン、数学者コンウェイのライフ・ゲーム[4]である。すこぶる単純な規則の許に、安定、不安定、振動、脈動、移動、拡大等々…さまざまな事象を内包している。ライフ・ゲームが、初期配位だけに依存した決定論的模型なのに対して、今の可動反強磁性三角格子模型は確率論的であるが、保存則を持っており、ライフ・ゲームと似通った興味で見ることもできる。冒頭にもふれたように、生命現象というものが、極めて狭いエネルギー幅の中で起る多様な事柄であることを思うと、具体的な対応は兎も角として、少くともこのような状況を理解・認識してゆく訓練の場・基礎概念構築の場としての意義があると思う。

参考文献

1) 伊豆山健夫・長谷田泰一郎両氏の発言に負うところが大きい。

2) G. H. Wannier ; Phys. Rev. 79, 357 (1950) and Phys. Rev. B7 5017(E) (1973)

3) T. Ogawa ; J. Phys. Soc. Jpn. 52 Suppl. 167 (1983)

T. Ogawa ; in Topological Disorder in Condensed Matter, Ed. by F. Yonezawa and T. Ninomiya, P60 (Springer 1983)

最も詳しく述べてあるのは

小川 泰；数理科学 No. 246, P.7 (1983)

4) マーチン・ガードナー：数学ゲームI（別冊サイエンス No. 24）P. 32 (1979)